



УДК 530.1:303.732.4

**ИНТЕГРИРОВАНИЕ ОТДЕЛЬНЫХ МНОГОМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ПФАФФА,
ИМЕЮЩИХ ВАЖНОЕ ПРИКЛАДНОЕ ЗНАЧЕНИЕ****INTEGRATION OF SEPARATE MULTIDIMENSIONAL PFAFF EQUATIONS
HAVING IMPORTANT APPLIED VALUE****А.В. Звягинцева, Г.В. Аверин
A.V. Zviagintseva, G.V. Averin***Белгородский национальный исследовательский университет, Россия, 308015, г.Белгород, ул. Победы, 85
Belgorod National Research University, 85 Pobedy St, Belgorod, 308015, Russia**E-mail: averin@bsu.edu.ru; zviagintseva@bsu.edu.ru*

Аннотация. С помощью уравнений Пфаффа математически описываются многие процессы и явления. Предложен метод интегрирования многомерных уравнений Пфаффа, которые связаны с формализованным представлением в дифференциальной форме уравнения сохранения энергии и различных балансовых уравнений. Получены общие интегралы таких уравнений в виде линейных аддитивных выражений относительно обобщенных координат. Сформулированы зависимости, которые дают возможность установить закономерности осуществления процессов в пространстве состояний сложной системы, исходя феноменологического анализа опытных данных. Выполнена обработка данных о физических свойствах химических элементов периодической системы. Для почти 90 элементов таблицы Менделеева в качестве примера построена феноменологическая модель описания отдельных свойств химических элементов, исходя из континуальных представлений пространства состояний. Показано, что для системы элементов могут быть предложены математические функции энтропии и потенциала, смысл которых связан с непрерывностью и континуальностью пространства состояний объектов. Предлагаемый подход связан с методом построения феноменологических моделей, принятым в термодинамике. Полученные результаты позволяют развить методы эмпирической обработки данных наблюдений о состояниях сложных систем.

Resume. Many processes and phenomena are mathematically described by Pfaff's equations. The method of integration of the multidimensional Pfaff's equations which are connected with the formalized representation in a differential form of the equation of conservation of energy and various balance equations is offered. The general integrals of such equations are received in the form of linear additive expressions concerning the generalized coordinates. Dependences which give the chance to determine consistent patterns of implementation of processes in a space of conditions of difficult system are formulated proceeding the phenomenological analysis of skilled data. Data processing of physical properties of chemical elements of periodic system is executed. As an example the phenomenological model of the description of some properties of chemical elements proceeding from continual representations of space of conditions is constructed for nearly 90 elements of periodic table. It is shown that mathematical functions of entropy and potential which are connected with continuity and infinity of the space of conditions of objects can be offered for system of elements. The offered approach is connected with the method of creation of phenomenological models which is accepted in thermodynamics. The received results allow to develop the methods of empirical data processing of observations of conditions of difficult systems.

Ключевые слова: динамические процессы, уравнения Пфаффа, общие интегралы уравнений Пфаффа, феноменологические зависимости, приложения.

Key words: dynamic processes, Pfaff's equations, general integrals of Pfaff's equations, phenomenological dependences, applications.

Введение

В естествознании существует класс дифференциальных уравнений, имеющих важное прикладное значение. Многие процессы изменения физических величин во времени описываются уравнениями Пфаффа. К данному классу относится уравнение сохранения энергии и различные



уравнения сохранения физических величин. Некоторые балансовые уравнения, записанные в дифференциальной форме, могут быть также представлены уравнениями Пфаффа.

Известно, что если в многомерном пространстве H^n введены координаты $p = (p_1, p_2, \dots, p_n)$, то уравнение Пфаффа имеет вид: $\psi_1(p)dp_1 + \psi_2(p)dp_2 + \dots + \psi_n(p)dp_n = 0$, где $\psi_k(p)$ – скалярные функции, заданные в пространстве H^n и удовлетворяющие условиям непрерывности и дифференцируемости [1–2]. Уравнение Пфаффа указывает на то, что между переменными p_1, p_2, \dots, p_n существует определенная связь, т.е. данные переменные уже не являются независимыми. Другими словами, если пространство H^n рассматривать как континуальное, то возможно представление многомерного пространства переменных в виде непрерывной, бесструктурной среды, где каждый элемент пространства связан со всеми соседними элементами с учетом закономерностей, свойственных изучаемой предметной области и определяемых исходным уравнением Пфаффа.

В связи с тем, что все измерения и наблюдения процессов и явлений основываются на изменении физических, биологических, экономических, социальных и др. величин, часто возникает задача по опытным данным установить закономерности, которые свойственны той или иной сложной системе и которые могут описываться уравнениями Пфаффа. При этом данное уравнение показывает, что в пространстве H^n задано некоторое поле направлений, а в любой точке этого пространства касательная к интегральному решению перпендикулярна соответствующему вектору поля направлений. Геометрически это означает, что векторное поле может допускать существование семейства поверхностей, которые в каждой точке пространства были бы ортогональны вектору поля направлений $\vec{e} = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n)$. Если это возможно, то уравнение Пфаффа интегрируемо одним соотношением.

В свою очередь, исходя из физических представлений, полученное решение уравнения Пфаффа указывает на возможность существования некоторой эмпирической меры ψ , которая характеризует каждое состояние сложной системы в пространстве H^n и может быть представлена скалярным полем. То есть для функции $\psi = \Psi(p_1, p_2, \dots, p_n)$ уравнение Пфаффа представимо в виде полного дифференциала, т.е. $d\psi = \psi_1(p)dp_1 + \psi_2(p)dp_2 + \dots + \psi_n(p)dp_n$, где $\partial\psi/\partial p_k = \psi_k(p)$, или путем умножения на интегрирующий множитель может быть приведено к полному дифференциалу $d\omega = \mu \cdot d\psi$.

Целью данной статьи является изучение возможности получения при определенных условиях интегральных решений отдельных многомерных уравнений Пфаффа, а также использование этих решений для описания опытных данных, исходя из особенностей представления данных в пространствах состояний сложных систем.

Феноменологические описания процессов и уравнения Пфаффа

Известно, что феноменологические модели характеризуют наблюдаемые свойства объектов, а также их изменения, без рассмотрения механизмов и сущности происходящих процессов. Исходя из принятых допущений, такие модели, в целом, с достаточной точностью позволяют описывать опытные данные и прогнозировать особенности формирования состояний объектов во времени.



Рассмотрим в общем виде задачу феноменологического описания сложной системы определенной природы, характеризующейся совокупностью разных показателей. Считаем, что имеется массив наблюдений, в который входят данные для m однотипных объектов и n показателей p_k , достаточно полно характеризующих эти объекты. Имеется также множество таблиц t , упорядоченных по времени, которые отражают процессы изменения состояний этих объектов во времени. Таким образом, изучаем спектр реализаций множества случайных процессов в виде временных рядов в количестве $f = n \cdot m$. В частном случае, когда состояния объектов не изменяются с течением времени, может рассматриваться только одна таблица данных «объекты – показатели».

На основе переменных p_1, p_2, \dots, p_n сформируем многомерное пространство координат H^n , в котором возможные состояния объектов, исходя из опытных данных, могут быть представлены многомерными точками $M(p_1, p_2, \dots, p_n)$, а процессы изменения состояния объектов за определенный период времени – многомерными кривыми. При этом каждая линия процесса в общем случае будет отображаться t точками. Предположим континуальность многомерной области H^n , что означает существование в данном пространстве бесконечного множества состояний для некоторой генеральной совокупности однотипных объектов и точки состояний $M(p_1, p_2, \dots, p_n)$ этих объектов непрерывно заполняют это пространство. При этом состояния и процессы изменения состояний объектов подчиняются определенным закономерностям, свойственным всему континууму H^n . Будем считать, что опытные точки из изучаемого массива данных являются ограниченной выборкой наблюдений из данной генеральной совокупности. В связи с тем, что континуальность пространства обладает определенными закономерностями, возникает задача на основе имеющихся опытных данных установить эти закономерности, используя для их описания уравнения Пфаффа.

Пусть каждому состоянию (каждой точке M) поставлена в соответствие некоторая эмпирическая мера ψ , которая представляет собой величину, комплексно характеризующую состояние объекта. Мера ψ определяется в опыте путем измерений и оценок и представляет собой системную величину, например, эмпирическую температуру, количество теплоты, статистическую вероятность событий, стоимость объектов, экспертный оценочный показатель и т.д. Эта величина в целом однозначно характеризует состояние системы в определенном аспекте и зависит от параметров атрибутивных свойств p_1, p_2, \dots, p_n .

Подобный подход позволяет использовать основополагающее понятие математического анализа – скалярное поле, и описать поле эмпирической меры функциональной зависимостью. Поэтому, формализуя данный подход в терминах математического анализа, сформулируем представление эмпирической меры в виде функции. Пусть рассматривается множество H^n упорядоченных систем чисел (p_1, p_2, \dots, p_n) , которые являются параметрами свойств некоторой системы. Если в силу некоторого эмпирического закона, правила или процедуры измерений каждой системе чисел (p_1, p_2, \dots, p_n) приведено в соответствие число ψ , то будем считать, что на множестве H^n определена эмпирическая мера состояния системы $\psi = \Psi(p_1, p_2, \dots, p_n)$ как функция n переменных.

Таким образом, сформулируем следующие аксиомы.



1. Пусть в пространстве состояний системы H^n каждой точке M поставлено в соответствие действительное число ψ , которое будем называть эмпирической мерой состояния объекта.

2. Величина $\psi = \Psi(M)$ является функцией точки и образует скалярное поле, которое является непрерывным в области H^n .

Для построения модели описания процессов изменения состояний объектов на основе уравнений Пфаффа используем высказанную выше гипотезу, что скалярное поле эмпирической меры ψ может быть аналитически описано в окрестности произвольной точки M функциональной зависимостью. Будем считать, что вблизи точки M осуществляется процесс изменения состояния системы. Для задания скалярного поля эмпирической меры $\psi = \Psi(M)$ как функции переменных p_1, p_2, \dots, p_n необходимо определить функцию точки. Предположим, что в области H^n можно задать аналитическую непрерывную функцию $T(p_1, p_2, \dots, p_n)$, на основе которой будет формироваться математическая модель. При известном виде функции $T(p_1, p_2, \dots, p_n)$ и значениях переменных p_1, p_2, \dots, p_n в области H^n можно построить еще одно скалярное поле, которое далее будем называть средой моделирования. Для конкретности и по аналогии с термодинамикой непрерывную функцию $T(p_1, p_2, \dots, p_n)$ определим как абсолютный индекс состояния системы. Исходя из этого, для построения в общем случае феноменологической модели сформулируем следующую аксиому.

3. Пусть в пространстве состояний системы H^n скалярные поля величин ψ и T однозначно связаны между собой. Если в окрестности любой точки M система осуществляет некоторый процесс l , то для линии процесса l справедливо соотношение $d\psi = c_l \cdot dT$, где c_l – эмпирические величины, которые являются функциями процесса и определяются в опыте.

Если в окрестности произвольной точки M осуществляется некоторый процесс, то элементарное изменение эмпирической меры ψ можно представить в виде:

$$d\psi = \left(\frac{\partial \psi}{\partial T} \right)_{p_2, \dots, p_n} \left(\frac{\partial T}{\partial p_1} \right) dp_1 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial T} \right)_{p_1, p_3, \dots, p_n} \left(\frac{\partial T}{\partial p_2} \right) dp_2 + \dots + \left(\frac{\partial \psi}{\partial T} \right)_{p_1, \dots, p_{n-1}} \left(\frac{\partial T}{\partial p_n} \right) dp_n \quad (1)$$

$$d\psi = c_1 \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial p_1} \right) dp_1 + c_2 \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial p_2} \right) dp_2 + \dots + c_n \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial p_n} \right) dp_n, \quad c_k = \left(\frac{\partial \psi}{\partial T} \right)_{z_1, \dots, z_{k-1}, z_{k+1}, \dots, z_n} \quad (2)$$

Величины c_k в общем случае могут зависеть от параметров свойств.

Уравнение (2) представляет собой пфаффову дифференциальную форму. Известно, что для многомерных систем существует три класса пфаффовых форм. Это пфаффовы формы, являющиеся полным дифференциалом; пфаффовы формы, которые не являются полным дифференциалом, но пропорциональны полному дифференциалу, т.е. имеют интегрирующий множитель, умножение на который превращает пфаффову форму в полный дифференциал некоторой функции. Кроме того, существует третий класс пфаффовых форм – пфаффовы формы, которые не являются полными дифференциалами и не имеют интегрирующего множителя. Принято называть пфаффовы формы второго класса (имеющие интегрирующий множитель) голономными, пфаффовы формы третьего класса (не имеющие интегрирующего множителя) – неголономными. Известно также, что пфаффома форма двух переменных всегда голономна. Что же касается пфаффовых форм (трех и более переменных), то одни из них голономны, другие – неголономны. Если пфаф-



фова форма голономна, то соответствующее уравнение преобразуется к полному дифференциалу и интегрируется. Поэтому для первых двух классов пфаффовых форм могут существовать скалярные поля эмпирической меры, для третьего класса – подобные скалярные поля не существуют.

Решение прикладных задач часто связано с уравнением, которое может быть представлено в виде пфаффовой формы $d\psi = \psi_1(p)dp_1 + \psi_2(p)dp_2 + \dots + \psi_n(p)dp_n$ и которое следует приблизить с учетом опытных данных уравнением (2). Если в континуальном пространстве H^n существуют закономерности, которые могут быть описаны интегральными решениями уравнений Пфаффа, то опытные данные должны с определенной точностью моделироваться соответствующими феноменологическими зависимостями. Также, как следует из приведенного материала, предлагаемый подход очень тесно связан с методом построения моделей, принятым в термодинамике.

Интегрирование уравнений Пфаффа для некоторых случаев

Будем интегрировать уравнения Пфаффа путем задания среды моделирования в виде аналитических функций, при этом феноменологические величины определяем по опытным данным.

Например, представим абсолютный индекс в виде меры относительных изменений:

$$T = \frac{p_1 \cdot p_2 \cdot \dots \cdot p_n}{p_{1_0} \cdot p_{2_0} \cdot \dots \cdot p_{n_0}}, \quad (3)$$

где p_{k_0} – некоторые опорные (пороговые, допустимые, максимальные и т.д.) значения исходных показателей. В этом случае для установления закономерностей используется принцип соответственных состояний, когда предлагается некоторая опорная точка $M_0(p_{1_0}, p_{2_0}, \dots, p_{n_0})$ и состояния всех остальных объектов соотносятся с этой точкой. Данный принцип обобщает эмпирическое наблюдение, которое указывает на то, что для одних и тех же объектов многие характеристики и показатели тесно связаны с некоторыми характерными свойствами для всех объектов приблизительно одинаково. При реализации этого принципа в процессе построения феноменологических моделей показатели состояний некоторых объектов выбираются в качестве опорных и все остальные свойства объектов соотносятся с этой точкой в изучаемом пространстве показателей.

Кроме уравнения (3) также можно использовать мультипликативные, степенные и другие функции относительно исходных показателей соответственно в виде:

$$T = \alpha \cdot \left(\frac{p_1}{p_{1_0}} \right)^{\alpha_1} \cdot \left(\frac{p_2}{p_{2_0}} \right)^{\alpha_2} \cdot \dots \cdot \left(\frac{p_n}{p_{n_0}} \right)^{\alpha_n}; \quad (4)$$

$$T = \alpha_1 \cdot \frac{p_1}{p_{1_0}} + \alpha_2 \cdot \frac{p_2}{p_{2_0}} + \dots + \alpha_n \cdot \frac{p_n}{p_{n_0}}; \quad (5)$$

$$T = p_1^2 + p_2^2 + \dots + p_n^2, \quad (6)$$

где α_k – некоторые коэффициенты.

Функция (4) часто применяется при обработке опытных данных в физике, в свою очередь, функция (5) широко используется при экспертной оценке состояний сложных систем, а функция (6) – при геометрическом моделировании пространств состояний систем. Могут быть также предложены и другие виды функций для задания значений абсолютного индекса, например, функции в виде среднего геометрического $T = \sqrt[n]{p_1 \cdot p_2 \cdot \dots \cdot p_n}$ или среднегеометрического взвешенного, а

также самые разные экспертные зависимости относительно индикаторов вида $\rho_k = \frac{P_k - P_{k \min}}{P_{k \max} - P_{k \min}}$.

Указанные зависимости часто применяются на практике.

Будем считать, что абсолютный индекс $T(p_1, p_2, \dots, p_n)$ может быть представлен в виде произведения функций, зависящих от показателей p_1, p_2, \dots, p_n , а именно $T = \varphi_1(p_1) \cdot \varphi_2(p_2) \cdot \dots \cdot \varphi_n(p_n)$. Эта гипотеза охватывает класс уравнений вида (3) – (4). В работах [1, 2] показано, что в этом случае для уравнения Пфаффа (2) существует интегрирующий делитель, который обращает данное уравнение в полный дифференциал. Интегрирующим делителем (2) будет функция $T = \varphi_1(p_1) \cdot \varphi_2(p_2) \cdot \dots \cdot \varphi_n(p_n)$. Подставляя данную функцию в (2) и деля это уравнение на величину T , получим:

$$ds = \frac{d\psi}{T} = c_1 \cdot \frac{\varphi'_1(p_1)}{\varphi_1(p_1)} dp_1 + c_2 \cdot \frac{\varphi'_2(p_2)}{\varphi_2(p_2)} dp_2 + \dots + c_n \cdot \frac{\varphi'_n(p_n)}{\varphi_n(p_n)} dp_n. \quad (7)$$

Интегрируя уравнение (7) в окрестности точки M , представим общий интеграл в виде:

$$s - s_0 = c_1 \cdot \ln \left(\frac{\varphi_1(p_1)}{\varphi_1(p_{1_0})} \right) + c_2 \cdot \ln \left(\frac{\varphi_2(p_2)}{\varphi_2(p_{2_0})} \right) + \dots + c_n \cdot \ln \left(\frac{\varphi_n(p_n)}{\varphi_n(p_{n_0})} \right). \quad (8)$$

где $s_0, p_{1_0}, \dots, p_{n_0}$ – параметры опорного состояния.

Данную функцию состояния обычно называют энтропией. Таким образом, для скалярного поля эмпирической меры $\psi(p_1, p_2, \dots, p_n)$ при задании абсолютного индекса произведением функций $T = \varphi_1(p_1) \cdot \varphi_2(p_2) \cdot \dots \cdot \varphi_n(p_n)$ и справедливости функциональных связей в виде $d\psi = c_i \cdot dT$ может быть определено скалярное поле энтропии вида (8), причем функция энтропии является аддитивной величиной, каждое слагаемое которой зависит только от одной величины p_k . Из приведенного видно, что смысл поиска функции энтропии связан с преобразованием координат p_1, p_2, \dots, p_n таким образом, чтобы получить линейную аддитивную функцию относительно новых обобщенных координат вида:

$$s - s_0 = c_1 \cdot q_1(p_1) + c_2 \cdot q_2(p_2) + \dots + c_n \cdot q_n(p_n), \quad (9)$$

где $q_k(p_k)$ – преобразованные координаты в виде логарифмических функций.

Геометрически это означает, что энтропия в пространстве новых координат q_1, q_2, \dots, q_n согласно (9) приводится к линейным зависимостям, которые обладают свойством аддитивности.

Таким образом, нелинейное преобразование координат при справедливости принятых гипотез позволяет с помощью преобразования $ds = \frac{d\psi}{T}$ представить нелинейное скалярное поле эмпирической меры в виде аддитивной линейной функции энтропии.

Получим дифференциальное уравнение для описания скалярного поля эмпирической меры. Из соотношения $T = \varphi_1(p_1) \cdot \varphi_2(p_2) \cdot \dots \cdot \varphi_n(p_n)$ имеем следующие зависимости:

$$\frac{\partial T}{\partial p_k} = \frac{\varphi'_k(p_k)}{\varphi_k(p_k)} \cdot T \quad \text{и} \quad \frac{1}{c_k} \left(\frac{\partial \psi}{\partial p_k} \right) = \frac{\varphi'_k(p_k)}{\varphi_k(p_k)} \cdot T, \quad \text{так как} \quad \frac{\partial \psi}{\partial p_k} = c_k \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial p_k} \right) \quad \text{при постоянных } c_k. \quad (10)$$



Суммируя соотношения (10) для всех n получим линейное неоднородное уравнение в частных производных первого порядка вида:

$$\frac{\varphi_1(p_1)}{c_1 \cdot \varphi'_1(p_1)} \left(\frac{\partial \psi}{\partial p_1} \right) + \frac{\varphi_2(p_2)}{c_2 \cdot \varphi'_2(p_2)} \left(\frac{\partial \psi}{\partial p_2} \right) + \dots + \frac{\varphi_n(p_n)}{c_n \cdot \varphi'_n(p_n)} \left(\frac{\partial \psi}{\partial p_n} \right) = n \cdot T. \quad (11)$$

В общем случае решение уравнения (11) осуществляется методом характеристик [3, 4], которые определяются системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$ds = n \cdot c_1 \cdot \varphi'_1(p_1) \frac{dp_1}{\varphi_1(p_1)} = n \cdot c_2 \cdot \varphi'_2(p_2) \frac{dp_2}{\varphi_2(p_2)} = \dots = n \cdot c_n \cdot \varphi'_n(p_n) \frac{dp_n}{\varphi_n(p_n)} = \frac{d\psi}{\varphi_n(p_n)}, \quad (12)$$

где s – параметр, который является энтропией в представлении (7). Если сложить все слагаемые уравнения (12) кроме последнего, то получим в точности уравнение (7).

Известно, что для уравнения (11) семейство поверхностей, ортогональных характеристикам (12), определяется из скалярного произведения вектора

$$\mathbf{W} = \frac{\varphi_1(p_1)}{c_1 \cdot \varphi'_1(p_1)} \mathbf{e}_1 + \frac{\varphi_2(p_2)}{c_2 \cdot \varphi'_2(p_2)} \mathbf{e}_2 + \dots + \frac{\varphi_n(p_n)}{c_n \cdot \varphi'_n(p_n)} \mathbf{e}_n \quad (13)$$

и единичного вектора $\mathbf{e} = \mathbf{e}_1 \cdot dp_1 + \mathbf{e}_2 \cdot dp_2 + \dots + \mathbf{e}_n \cdot dp_n$, а именно $(\mathbf{W} \cdot \mathbf{e}) = 0$, откуда:

$$\frac{\varphi_1(p_1)}{c_1 \cdot \varphi'_1(p_1)} dp_1 + \frac{\varphi_2(p_2)}{c_2 \cdot \varphi'_2(p_2)} dp_2 + \dots + \frac{\varphi_n(p_n)}{c_n \cdot \varphi'_n(p_n)} dp_n = 0. \quad (14)$$

Данное уравнение приводится к полному дифференциалу, поэтому существует потенциал $P(p_1, p_2, \dots, p_n) = C$ пространства состояний H^n , который можно представить в виде семейства поверхностей, ортогональных линиям энтропии. Таким образом, для некоторых видов функций абсолютного индекса можно получить простые функции потенциала.

Наиболее важной особенностью энтропии s и потенциала P является то, что при справедливости условия существования поля эмпирической меры данные величины представляют собой функции состояния системы, а также то, что энтропия и потенциал отличаются свойством аддитивности. Изменение данных величин зависит только от начального и конечного состояния объекта и не зависит от пути его перехода между этими состояниями. Функции энтропии и потенциала определяют естественные криволинейные координаты в преобразованном континуальном пространстве, при этом каждый объект будет занимать некоторое положение относительно этих координат.

Общие интегралы отдельных уравнений Пфаффа

Получим некоторые уравнения и соотношения для описания состояний сложных систем. В данном варианте построения теории важным является выбор среды моделирования, исходя из задания различных видов функций для абсолютного индекса T .

Для абсолютного индекса вида (3) энтропию состояния системы можно представить следующим образом:

$$ds = \frac{d\psi}{T} = \beta_1 \cdot \frac{dp_1}{p_1} + \beta_2 \cdot \frac{dp_2}{p_2} + \dots + \beta_n \cdot \frac{dp_n}{p_n}, \quad (15)$$



$$s - s_0 = \beta_1 \cdot \ln \left(\frac{p_1}{p_{1_0}} \right) + \beta_2 \cdot \ln \left(\frac{p_2}{p_{2_0}} \right) + \dots + \beta_n \cdot \ln \left(\frac{p_n}{p_{n_0}} \right). \quad (16)$$

В свою очередь согласно (14), потенциал $P(p_1, p_2, \dots, p_n) = C$ может быть найден из уравнения:

$$\frac{p_1}{\chi_1} dp_1 + \frac{p_2}{\chi_2} dp_2 + \dots + \frac{p_n}{\chi_n} dp_n = 0 \quad \text{или} \quad (17)$$

$$P(p_1, p_2, \dots, p_n) = \frac{1}{2} \left(\frac{p_1^2 - p_{1_0}^2}{\chi_1} + \frac{p_2^2 - p_{2_0}^2}{\chi_2} + \dots + \frac{p_n^2 - p_{n_0}^2}{\chi_n} \right), \quad (18)$$

где принято, что $P(p_{1_0}, p_{2_0}, \dots, p_{n_0}) = 0$. В уравнениях (15) – (18) величины $\beta_k = \chi_k = c_k$.

Рассмотрим теперь уравнение для абсолютного индекса вида (4). Можно показать, что для данного уравнения при $\alpha = 1$ энтропия и потенциал состояния системы представляются соответственно в виде уравнений (16) и (18), где величины $\beta_k = \chi_k = \alpha_k \cdot c_k$.

В свою очередь, при представлении абсолютного индекса в виде уравнения (5) энтропия и потенциал также могут быть представлены уравнениями (16) и (18), где $\beta_k = \frac{c_k}{n}$ и $\chi_k = c_k$, а при представлении абсолютного индекса в виде зависимости (6) в уравнениях (16) и (18) величины β_k и χ_k соответственно равны $\beta_k = \frac{2 \cdot c_k}{n}$ и $\chi_k = c_k$. Для уравнений (5) и (6) соответствующие зависимости для энтропии и потенциала получены, исходя из однородности функций абсолютного индекса [1].

Таким образом, задавая различные виды функций индекса T , можно проверять полученные зависимости на адекватность путем обработки имеющихся опытных данных об изменении состояний той или иной системы. Поэтому, в общем случае приходим к необходимости использовать при обработке данных обобщенные координаты в виде энтропии и потенциала. Если эмпирически с учетом принятых гипотез удастся получить качественные регрессионные зависимости, позволяющие связать эмпирическую меру состояния системы с энтропией пространства состояний $\psi = \varphi(s)$, то возможно описание состояний сложной системы на основе феноменологических соотношений. При этом с определенной достоверностью будет подтверждена гипотеза о существовании скалярного поля эмпирической меры.

Область применения данного метода охватывает процессы, которые медленно меняются во времени и для которых существуют функции эмпирических мер состояний систем и их непрерывные производные $c_i = \frac{d\psi}{dT}$. Сущность метода заключается в установлении возможности применения к описанию данных опыта или наблюдений уравнений Пфаффа и эмпирической проверки гипотезы о континуальности пространства состояний изучаемой сложной системы.



Пример обработки опытных данных

Анализ опытных данных [1, 2, 5–9] показывает, что для многих сложных систем самой разной природы могут быть установлены фундаментальные закономерности на основе феноменологических описаний процессов изменения состояний этих систем. В указанных работах данный метод применялся к описанию опытных данных, характеризующих общественные и биологические системы. Представим возможности данного метода по отношению к построению описаний данных для физико-химических систем. Покажем для примера, что для таких систем, состоящих из объектов одного класса, могут быть получены феноменологические соотношения, аналогичные по сути основным уравнениям термодинамики, в том числе и уравнение, которое подобно уравнению сохранения «энергии». Это говорит о том, что для континуальных пространств, характеризующих системы самой разной природы, логический метод моделирования, принятый в термодинамике, является универсальным. Однако, получаемые закономерности будут отражать особенности предметной области и формулируемые при этом определения, положения и соотношения только математически будут соответствовать принятым в термодинамике, т.к. несут в себе иной физический смысл.

Для упрощения и наглядности будем рассматривать сложные системы, состояния которых характеризуются двумя параметрами и одной эмпирической мерой. В качестве изучаемой сложной системы рассмотрим химические элементы периодической системы Менделеева. С этой целью создадим массив данных с их основными физическими и химическими свойствами. Примем свойства водорода в качестве опорного состояния для сравнения химических элементов между собой.

Рассмотрим континуальное пространство свойств элементов периодической системы Менделеева для двух переменных H^2 . Для любой точки M дифференциал энтропии согласно (15) может быть представлен для двух переменных в виде:

$$ds = c_1 \cdot \frac{dp_1}{p_1} + c_2 \cdot \frac{dp_2}{p_2} . \quad (19)$$

В свою очередь, в пространстве переменных H^2 в качестве абсолютного индекса можно для той же точки M найти меру относительных изменений (3), которая будет иметь вид:

$$T = \frac{p_1 \cdot p_2}{p_{1H} \cdot p_{2H}} \quad (20)$$

где p_{1H} и p_{2H} – значения выбранных физико-химических свойств водорода. Сделав обозначение $R_m = p_{1H} \cdot p_{2H}$, определим с учетом соотношений (12) изменение эмпирической меры $d\psi = T \cdot ds$, тогда:

$$d\psi = T \cdot ds = T \cdot \left(c_1 \cdot \frac{dp_1}{p_1} + c_2 \cdot \frac{dp_2}{p_2} \right) = \frac{1}{R_m} (c_1 \cdot p_2 \cdot dp_1 + c_2 \cdot p_1 \cdot dp_2) . \quad (21)$$

Преобразуя данное уравнение, получим следующую зависимость:

$$d\psi = du + \frac{p_2 \cdot dp_1}{R_m} , \quad (22)$$



где величина du равна: $du = \frac{1}{R_m} (c_1 \cdot p_2 \cdot dp_1 + c_2 \cdot p_1 \cdot dp_2) - \frac{1}{R_m} p_2 \cdot dp_1$.

Применяя к величине du признак Эйлера для пфаффовых форм, получим, что du является полным дифференциалом (функцией состояния) при выполнении следующего условия:

$$c_1 - c_2 = 1. \quad (23)$$

Легко показать, что в этом случае $du = c_2 \cdot dT$, $di = d(u + T) = c_1 \cdot dT$, а величины du и di зависят только от абсолютного индекса T .

В результате данного простого вывода в нашем случае получены в виде уравнений (22) и (23) логические аналоги уравнения сохранения энергии и уравнения Майера в термодинамике для безразмерных переменных. В общем случае следует отметить, что полученные соотношения справедливы для любых континуальных пространств состояний систем независимо от природы изучаемых данных. Поэтому вполне естественно, что суть величин u и i далека от соответствующих аналогов (энергия и энтальпия) в термодинамике. Это же относится и к уравнению (22), которое нельзя рассматривать как уравнение сохранения энергии в обычном физическом представлении. Величина u является математической функцией, определяющей изменение состояния объекта по отношению к среде моделирования. В случае, если на основе обработки опытных данных существует тождественность левой и правой части уравнения (23), то в пространстве H^2 можно построить криволинейные координаты и ввести соответствующие комплексные переменные в виде функций состояния s , u и i , при этом будет наблюдаться справедливость уравнения в форме (22).

В свое время А. Пуанкаре указывал на тот факт, что выбор функции, которую сегодня называют энергией, является условным и, единственная возможная формулировка первого закона термодинамики для физико-химических систем формулируется в виде: «...существует нечто, остающееся постоянным. Данная формулировка охватывает как закон сохранения энергии, так и закон сохранения массы. Это «нечто» представляет собой математическую функцию, физический смысл которой интуитивно не ясен» [10]. Полученный выше логический аналог закона сохранения «энергии» в виде соотношения (22) подтверждает справедливость утверждения А. Пуанкаре. При этом, в рассматриваемом нами варианте теории, понятия «энтропии» и «энергии» действительно являются математическими функциями, смысл которых связан с непрерывным континуальным представлением пространства состояний изучаемой системы, свойства которой определяются характерной физикой процессов. На эту особенность уравнения сохранения энергии указывали также в свое время Фальк и Юнг [11]. Отметим, что уравнения вида (22) и (23) можно получить для трех и более переменных p_k , например, так как это сделано в работе [1]. Таким образом, если приведенные выше гипотезы являются справедливыми, то на основе обработки опытных данных можно получить эмпирические аналоги уравнений (19) и (22) и тем самым установить для изучаемой сложной системы некоторый закон «сохранения» для величины полевой природы.

Например, для построения уравнения состояния системы, состоящей из химических элементов периодической таблицы Менделеева, примем в качестве атрибутивных показателей: p_1 – радиус атома, пм; p_2 – атомную массу элемента, а.е.м.



Рассмотрим сложное совместное событие одновременного наблюдения этих показателей в пространстве состояний системы. Определим, что состояние каждого объекта (элемента) может характеризоваться данным наблюдаемым событием и величинами p_1 и p_2 . Найдем статистическую вероятность этого события на основе опытных данных, которые имеются в базе данных, с использованием алгоритмов группировки и подсчета частот совместных событий. С этой целью можно воспользоваться инструментами программного продукта Statistica. Данная статистическая вероятность w подсчитывается по всей группе объектов путем определения относительных частот совместных событий. Примем данную статистическую вероятность в качестве эмпирической меры для построения феноменологической модели пространства состояний на основе уравнений Пфаффа.

Исходя из полученных данных с учетом вероятностной оценки совместных событий, связанных с наблюдением показателей p_1, p_2 , было найдено уравнение состояния объектов в виде вероятностного распределения. Соответствующая модель для периодической таблицы Менделеева получена в виде пробит-зависимости величины вероятности совместных событий наблюдения показателей p_1, p_2 от энтропии состояния системы:

$$w = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \int_{-\infty}^{\text{Pr}} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt; \quad \text{Pr} = -4.030 + s;$$

$$s = 1.109 \cdot \ln\left(\frac{p_1}{p_{1H}}\right) + 0.540 \cdot \ln\left(\frac{p_2}{p_{2H}}\right). \quad (24)$$

Коэффициент корреляции зависимости (24) составил 0.96, результаты обработки данных для 90 химических элементов приведены на рисунке 1. Показатели p_1, p_2 относились к значениям величин p_{1H}, p_{2H} , которые соответствуют свойствам водорода и равны: $p_{1H} = 53$ пм; $p_{2H} = 1.0078$ а.е.м.

Из уравнения состояния (24) видно, что $c_1 - c_2 = 0.569$. Так как соотношение (23) не выполняется ($c_1 - c_2 \neq 1$), уравнение (22) будет давать определенные погрешности. Поэтому, используя вид уравнения сохранения (22), определим параметры этого уравнения путем обработки всего массива данных для пространства состояний, образованного двумя свойствами химических элементов – радиусом атома и атомной массой. Результаты обработки опытных данных приведены на рисунке 2, соответствующее уравнение в конечно-разностной форме имеет вид:

$$T \cdot \Delta s = \Delta u + 5.304 \cdot \frac{p_2}{R_m} \cdot \Delta p_1 - 56.38, \quad (25)$$

где $\Delta s = s - s_0$; $\Delta u = c_2 \cdot (T - 1)$; $\Delta p_1 = p_1 - 53$ (пм) – приращения величин относительно опорной точки (свойства водорода); $R_m = 53.41$ (пм·а.е.м.).

Значение величин s и u для водорода приняты равными нулю. Коэффициент корреляции для уравнения (25) составляет 0.997, средняя относительная ошибка – 6.5%.

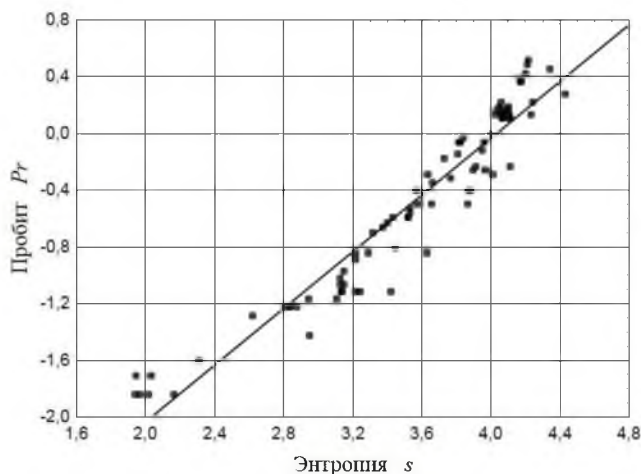


Рис. 1. Зависимость вероятности w от величины s для радиуса атома и атомной массы химических элементов
Fig. 1. Dependence of probability w on size s for the radius of atom and atomic mass of chemical elements

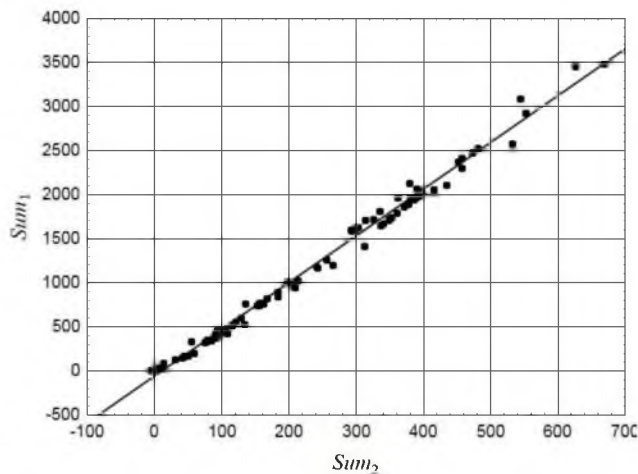


Рис. 2. Результаты обработки данных согласно уравнения (25):
Fig. 2. Results of data processing according to the equation (25):

$$Sum_1 = T \cdot \Delta s - \Delta u ; Sum_2 = (p_2/R_m) \cdot \Delta p_1$$

$$Sum_1 = T \cdot \Delta s - \Delta u ; Sum_2 = (p_2/R_m) \cdot \Delta p_1$$

Уравнение (25) может быть приведено к виду $d\psi = T \cdot ds = du + p_2 \cdot dp_1$ путем выбора наиболее оптимальных значений параметров в опорной точке и установления эквивалентности между величинами. Анализ показывает, что подобные результаты могут быть получены для различных комбинаций параметров свойств химических элементов.

Выводы

Из приведенного выше материала видны явные системные аналогии, связанные с построением феноменологических моделей в термодинамике. Предложенный метод описания структурированных опытных данных является прямым развитием метода термодинамики и позволяет устанавливать феноменологические закономерности, свойственные изучаемым системам. Континуальный принцип представления пространства состояний исследуемых объектов и вероятностные методы оценки совместных событий наблюдения параметров свойств этих объектов дают возможность применить существующий математический аппарат термодинамики при изучении систем самой разной природы. При этом гипотеза о полевого представлении эмпирической меры позволяет сформулировать принцип существования энтропии и получить логический аналог уравнения сохранения «энергии» для целого ряда систем. Это указывает на то, что уравнение сохранения энергии является математическим выражением, отражающим континуальные закономерности пространств состояний систем, которое в термодинамике обосновано экспериментально и логически распространено на многомерные системы физической природы. Все это говорит о принципиальных возможностях проникновения метода термодинамики в нефизические научные области.

Список литературы

1. Аверин Г.В. 2014. Системодинамика. Донецк, Донбасс, 405. – Электр. ресурс. URL: <http://www.chronos.msu.ru/ru/rules/item/sistemodinamika-2> (30.08.16).



- Averin G.V. 2014. Sistemodinamika [Systemdynamics]. Doneck, Donbass, 405. – Available at: <http://www.chronos.msu.ru/ru/rrules/item/sistemodinamika-2> (accessed August 30, 2016). (in Russian).
2. Аверин Г.В., Звягинцева А.В. 2013. Взаимосвязь термодинамической и информационной энтропии при описании состояний идеального газа // Системный анализ и информационные технологии в науках о природе и обществе, 1(4)-2(5): 26–38.
- Averin G.V., Zvjaginceva A.V. 2013. Vzaimosvjaz' termodinamicheskoj i informacionnoj jentropii pri opisani sostojanij ideal'nogo gaza [The relationship of the thermodynamic and information entropy in the description of the ideal gas states] // Sistemnyj analiz i informacionnye tehnologii v naukah o prirode i obshhestve, 1(4)-2(5): 26–38. (in Russian).
3. Степанов В.В. 1959. Курс дифференциальных уравнений. М., Физматгиз, 473.
- Stepanov V.V. 1959. Kurs differencial'nyh uravnenij [Course of the differential equations]. Moscow, Fizmatgiz, 473. (in Russian).
4. Эльсгольц Э.Э. 1969. Дифференциальное уравнение и вариационное исчисление. М., Наука, 424.
- Jel'sgol'c E.E. 1969. Differencial'noe uravnenie i variacionnoe ischislenie [Differential equation and variational calculus]. Moscow, Nauka, 424. (in Russian).
5. Averin G.V., Zviagintseva A.V., Konstantinov I.S. and Ivashchuk O.A. 2015. Data Intellectual Analysis Means Use for Condition Indicators Assessment of the Territorial and State Formations. Research Journal of Applied Sciences, 10(8): 411–414. – Available at: <http://medwelljournals.com/abstract/?doi=rjasci.2015.411.414> (accessed August 27, 2016). DOI: 10.3923/rjasci.2015.411.414.
6. Звягинцева А.В. 2016. Вероятностные модели взаимосвязи физиологических характеристик и ареалов биологических видов. Научные ведомости Белгородского государственного университета. Сер. Естественные науки, 18 (239). Выпуск 36: 76–86.
- Zvjaginceva A.V. 2016. Verojatnostnye modeli vzaimosvjazi fiziologicheskikharakteristik i arealov biologicheskikh vidov [Probabilistic models relationships physiological characteristics and habitats of species]. Nauchnye vedomosti Belgorodskogo gosudarstvennogo universiteta. Ser. Estestvennye nauki, 18 (239). Issue 36: 76–86. (in Russian).
7. Averin G.V., Zviagintseva A.V., Shevtsova M.V. and Kurtova L.N. 2016. Probabilistic Methods of a Complex Assessment of Quantitative Information. Research Journal of Applied Sciences, 11: 415–418. – Available at: <http://www.medwelljournals.com/abstract/?doi=rjasci.2016.415.418> (accessed August 28, 2016). DOI: 10.3923/rjasci.2016.415.418.
8. Звягинцева А.В. 2016. Вероятностные методы комплексной оценки природно-антропогенных систем / Под науч. ред. д.т.н., проф. Г.В. Аверина. М., Спектр, 257.
- Zviagintseva A.V. 2016. Verojatnostnye metody kompleksnoj ocenki prirodno-antropogennyh sistem [Probabilistic methods of a complex assessment of natural and anthropogenic systems] / Pod nach. red. d.t.n., prof. G.V. Averina. Moscow, Spektr, 257. (in Russian).
9. Звягинцева А.В. 2016. Модели состояния и развития стран мира на основе оценки статистических вероятностей индикативных событий. Научные ведомости Белгородского государственного университета. Сер. Экономика. Информатика, 16 (237). Выпуск 39: 123–131.
- Zviagintseva A.V. 2016. Modeli sostojanija i razvitija stran mira na osnove ocenki statisticheskikh verojatnostej indikativnyh sobytij [The world countries state and development models on the indicative events statistical probabilities assessment basis]. Nauchnye vedomosti Belgorodskogo gosudarstvennogo universiteta. Ser. Jekonomika. Informatika, 16 (237). Issue 39: 123–131. (in Russian).
10. Пуанкаре А. 1983. О науке / Пер. с франц. М., Наука, 560.
- Puankare A. 1983. O nauke [About science] / Per. s franc. Moscow, Nauka, 560.
11. Falk G. und Jung H. 1959. Axiomatik der Thermodynamik // Hdb. Phys. III/2, Berlin: 119–175.